

Correction de l'examen de TP modélisation moléculaire

3^{ème} année LMD

2022-2023

Partie I: Logiciel GAUSSIAN

a- L'interprétation des résultats (9 pts)

Nom de la molécule: Aspirine (0,5pts) ; **Type de calcul:** Optimisation de la géométrie (0,5pts)

Méthode de calcul: B3LYP (0,5pts) ; **La base:** 6-31G(d) (0,5pts)

Charge: 0 (0,5pts) ; **Totale énergie:** -648,69114233 a.u (0,5pts)

Moment dipolaire: 2,6408 debye (0,5pts)

b- La différence entre l'angle normale et l'angle dièdre:

L'angle plane est formé par deux liaisons consécutives ou par 3 atomes liés, alors que l'angle dièdre (angle de torsion) est formé par 4 atomes liés. (1 pts)

c- La différence entre le calcul de l'énergie SP (Single Point) et OPT, et l'énergie qui donne des bon résultats :

Un calcul **SP** (Single Point) désignant des orbitales moléculaires dans une géométrie fixé. (1pts)

Un calcul d'une énergie **OPT** désignant l'optimisation de la géométrie est c'est l'énergie la plus stable correspond à l'énergie la plus basse . (1,5 pts)

d- L'extension d'un fichier input pour le logiciel Gaussian est : (.gif) (1pts)

e- L'extension d'un fichier output pour le logiciel Gaussian est: (.log) (1pts)

Parti II : le programme Hulis

1- Nombre d'électrons: 4 (0,5pts), nombre d'OA $2p_z$: 4 (0,5pts)

2- Déterminant séculaire de s-cis butadiène en fonction des solutions α .

$$\begin{vmatrix} \alpha - E & \beta & 0 & 0 \\ \beta & \alpha - E & \beta & 0 \\ 0 & \beta & \alpha - E & \beta \\ 0 & 0 & \beta & \alpha - E \end{vmatrix} = 0 \quad (1 \text{ pts})$$

3- Diagramme énergétique π de cette molécule.

$$\underline{\alpha - 1,62 \beta} \quad (0,5 \text{ pts})$$

$$\underline{\alpha - 0,62 \beta} \quad (0,5 \text{ pts})$$

$$\alpha + 0,62 \beta \quad (0,5 \text{ pts})$$

$$\alpha + 1,62 \beta \quad (0,5 \text{ pts})$$

4- Les expressions analytiques des OMs.

Correction de l'examen de TP modélisation moléculaire

3^{ème} année LMD

2022-2023

$$\omega_1 = 0,37 \rho_1 + 0,60 \rho_2 + 0,60 \rho_3 + 0,37 \rho_4 \text{ (0,5pts)}$$

$$\omega_2 = -0,60 \rho_1 - 0,37 \rho_2 + 0,37 \rho_3 + 0,60 \rho_4 \text{ (0,5pts)}$$

$$\omega_3 = 0,60 \rho_1 - 0,37 \rho_2 - 0,37 \rho_3 + 0,60 \rho_4 \text{ (0,5pts)}$$

$$\omega_4 = -0,37 \rho_1 + 0,60 \rho_2 - 0,60 \rho_3 + 0,37 \rho_4 \text{ (0,5pts)}$$

5- L'énergie totale π en fonction de α et β .

$$E_T^\pi = 2e_1 + 2e_2$$

$$E_T^\pi = 4\alpha + 4,48\beta \text{ (2 pts)}$$

6- L'ordre de liaison et la charge nette pour les quatre atomes de carbone .

l'ordre de liaison : $p_{12} = 0,89$; $p_{13} = 0$; $p_{14} = 0$ (0,5pts)

$$p_{21} = 0,89 \quad ; \quad p_{23} = 0,45 \quad ; \quad p_{24} = 0 \quad \text{(0,5pts)}$$

$$p_{31} = 0 \quad ; \quad p_{32} = 0,45 \quad ; \quad p_{34} = 0,89 \quad \text{(0,5pts)}$$

$$p_{41} = 0 \quad ; \quad p_{42} = 0 \quad ; \quad p_{43} = 0,89 \quad \text{(0,5pts)}$$

charge nette: $Q_n = q_f - q_i$

$$Q_1 = Q_2 = Q_3 = Q_4 = 0 \text{ (1 pts)}$$

$$\text{car } q_1 = q_2 = q_3 = q_4 = q_i = 1$$

$$q_{1f} = q_{2f} = q_{3f} = q_{4f} = q_f = 1$$